



TITLE:

# 有機分子性結晶の気体吸着状態の解析

AUTHOR(S):

津江, 広人

---

CITATION:

津江, 広人. 有機分子性結晶の気体吸着状態の解析. 京都大学化学研究所  
スーパーコンピュータシステム研究成果報告書 2017, 2016: 54-54

ISSUE DATE:

2017-03

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/227986>

RIGHT:

有機分子性結晶の気体吸着状態の解析  
Analysis of the gas sorption state of organic molecular crystal

京都大学 大学院人間・環境学研究科 関連環境学専攻 分子・生命環境論講座  
津江 広人

研究成果概要

多孔性材料は、気体分子の分離・精製・貯蔵などの用途に幅広く適用可能なため、古くから研究され、現在でもなお新規材料の開拓が活発に進められている。これまでに当研究室では、有機分子性結晶を基体とする気体吸着材料の開発を目的として、安価かつ生体適合性をもつジペプチドに着目し、その結晶構造と気体吸着特性の関係について報告してきた。その研究過程において、N 末端と C 末端の両方を保護した Boc-L-Met-L-AlaOMe (以下, **MAP** と略記。図1) の単結晶が、二酸化炭素を高選択的に吸着することが判明している。

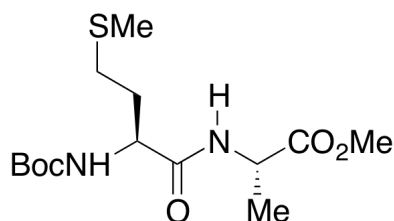


図1 **MAP** の分子構造

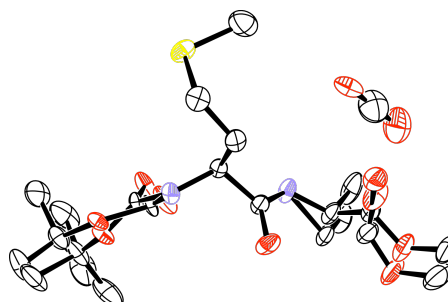


図2 **MAP** の CO<sub>2</sub> 吸着状態の OTREP 図

本研究では, **MAP** が示す気体吸着特性を解明することを目的として, **MAP** が二酸化炭素を吸着した状態の結晶構造解析を行い, 結晶を構成する **MAP** と結晶中に吸着された二酸化炭素との間に働く分子間相互作用の解析を行った。ここでは, 京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用した。

単結晶X線構造解析の結果, **MAP** の結晶中に二酸化炭素が吸着された状態を原子レベルで可視化することに成功した(図2)。二酸化炭素の周辺には, 四分子の **MAP** が近接しており, これらとの分子間相互作用によって, **MAP** の結晶中に二酸化炭素が吸着されていることが示唆された。そこで, 計算化学アプリケーション Materials Studio を用いて, 二酸化炭素の吸着状態の原子座標から結晶構造の構造最適化を行った後, Gaussian 09 を用いて二次の摂動法による *ab initio* 計算とエネルギー分割計算を行い, **MAP** と二酸化炭素との間に働いている分子間相互作用を解析した。その結果, 分散力が, 両者の間に働く分子間相互作用の主たるものであり, **MAP** による高選択的な二酸化炭素の吸着挙動は, 同相互作用によって発現していることが明らかとなった。